Transport properties of quantum systems(Development of Operator Algebras)

AUTHOR(S):
緒方, 芳子

数理解析研究所講究録 1459 巻 2005 年 14-27

Transport properties of quantum systems

Department of Mathematical Sciences, University of Tokyo,
Yoshiko Ogata
東京大学数理科学研究科　緒方芳子

Collaboration with V. Jakšić McGill University,
C.-A. Pillet, CPT-CNRS, UMR

近年、C^*-環を用いた量子非平衡系の研究がすすめられている。本稿では、この枠組みにおいて、輸送現象を考察する。特に、非平衡定常状態における heat flow が Green-Kubo formula を満たすことをしめす。

1 非平衡定常状態

非平衡状態を定義するとき、その与え方は一意ではない。量子力学は、可逆な時間発展を与えるから、ハミルトニアンによって時間発展する有限系を考えているだけでは、日常的に目にする不可逆性を導くことは出来ない。そこで、不可逆性を導くために、ランダムな項を加えたり、外部の系と相互作用させたりする。

本稿で考える非平衡状態は、以下のように与えられる：まず、非可逆性を与えるため、無限量子系を考える。そして、この無限量子系をいくつかの部分にわけ、各部分がそれぞれ異なる温度にあるような状況を考える。時刻 $t=0$ から、これらの部分系を相互作用させる。各部分の温度の違いと、系が無限に広がっていることから、時間が無限に経ったときに、平衡状態とはことなる定常状態が実現する。こうして得られる状態を、非平衡定常状態と呼ぶ。

数学的には、この状況を以下のような枠組みでとらえる。まず、量子物理系は C^*-力学系によってあらわす。すなわち、C^*-環の元によって物理量をあたえ、その時間発展を、その上の strongly continuous one parameter group of automorphisms によってあらわす。この時間発展に対する熱平衡状態を KMS state として与えることにする。

各部分系は、$\mathbb{I}$ を含む C^*-環 $\mathcal{O}_K$ とその上の strongly continuous one parameter group of automorphisms τ_K^t $t\in\mathbb{R}$ によってあたえられる C^*-力学系 $(\mathcal{O}_K,\tau_K,\omega_K)$, $K=1,\cdots,N$ によりあらわされる。各 τ_K^t の generator を δ_K, ω_K を $\mathcal{O}_K$ 上の (τ_K,β_K)-KMS state とする。

$\mathcal{O}_K$ のテンソル積

$$\mathcal{O}\equiv\bigotimes_K\mathcal{O}_K$$

が、全系をあらわす C^*-環である。部分系間の相互作用は $\mathcal{O}$ の self-adjoint な元 V によって与える。相互作用を含んだ全系の時間発展 τ^t は、

$$\delta = \sum_K \delta_K + i[V, \cdot]$$

によって生成される C^*-dynamics として定義される。

Definition 1.1 (Ruelle 00[R]) 状態 $\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$ を

$$\omega_{\underline{\beta}}^{(0)} \equiv \bigotimes_K \omega_K$$

とする。
状態 $\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$ から得られる非平衡定常状態、*Non-Equilibrium Steady States (NESS)* $\Sigma_\tau(\omega_{\underline{\beta}}^{(0)})$ は、状態

$$\frac{1}{T}\int_0^T \omega_{\underline{\beta}}^{(0)} \circ \tau_t \, dt$$

の $T \to \infty$ における *weak-* acclumulation point* の集合のことである。

$\mathcal{O}$ が $\mathbb{I}$ を含むことから、$\Sigma_\tau(\omega_{\underline{\beta}}^{(0)})$ は空でない。また、定義からわかるように、$\Sigma_\tau(\omega_{\underline{\beta}}^{(0)})$ の元は、τ に対して不変である。

$\Sigma_\tau(\omega_{\underline{\beta}}^{(0)})$ は、状態の集合として定義されたので、一般には、それは複数の状態をふくむ。また、初期状態が $\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$ から微小にずれた状態についての NESS は、$\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$ についての NESS と一般に異なる。これに対して、 uniqueness を以下のように定義する。

Definition 1.2
NESS $\Sigma_\tau(\omega_{\underline{\beta}}^{(0)})$ が一点 $\omega_{\underline{\beta},+}$ からなり、任意の $\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$*-normal state* η に対して、

$$\lim_{t\to\infty} \eta\left(\tau_t(A)\right) = \omega_{\underline{\beta},+}(A), \quad \forall A \in \mathcal{O}$$

がとなるとき、*quantum dynamical system* $(\mathcal{O}, \tau, \omega_{\underline{\beta}}^0)$ の *NESS* は *uniqueness* を満たす、ということにする。

実際、uniqueness は、いくつかの系で示されている。

1.Asymptotic abelian な系

τ が asymptotic abelianness

$$\lim_{t\to\infty} \|[A, \tau_t(B)]\| = 0, \quad \forall A, B \in \mathcal{O}$$

を満たし、$\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$ が factor state であるとき、$\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$ の GNS 表現 $(\mathcal{H}, \pi, \Omega)$ 上で

$$\sigma weak - \lim_{t\to\infty} \pi(\tau^t(A)) = \omega_{\underline{\beta}}^{(0)}(A) \cdot \mathbb{I}.$$

これより任意の $B, C \in \mathcal{O}$ に対して

$$\lim_{t\to\infty} \omega_{\underline{\beta}}^{(0)}(B^* \tau^t(A) C) = \omega_{\underline{\beta}}^{(0)}(A) \omega_{\underline{\beta}}^{(0)}(B^* C).$$

任意の $\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$-normal state η は、$\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}(B^* \cdot C), B, C \in \mathcal{O}$ の形の線型汎関数の線型和によりノルム近似されるので、

$$\lim_{t\to\infty} \eta(\tau^t(A)) = \omega_{\underline{\beta}}^{(0)}(A)$$

が成り立つ。

2.Spin Fermion model (Jakšić Pillet 2002 [JP1],[JP2])

ひとつのスピンが、二つの Fermion heat bath と接している状況を考える。二つの Fermion heat bath は、それぞれ Hilbert space $\mathfrak{h}_L, \mathfrak{h}_R$ の上の CAR-algebra $\mathcal{O}_L$, $\mathcal{O}_R$ として与えられる。ここで、Hilbert 空間 $\mathfrak{h}$ 上の CAR algebra とは、$\mathbb{I}$ と消滅演算子 $a(f)$ によって生成される C^*-algebra で map

$$f \in \mathfrak{h} \to a(f) \in \mathcal{A}$$

は antilinear, 交換関係

$$\{a(f), a(g)\} = 0$$
$$\{a(f), a^*(g)\} = \langle f, g \rangle \cdot \mathbb{I}$$

を満たすもののことである。それぞれの時間発展は、quasi-free dynamics τ_L, τ_R,

$$\tau_K^t(a(f)) = a\left(\mathrm{e}^{ith_K} f\right), \quad K = L, R$$

で与えられる。ここで、h_K は一粒子ハミルトニアンである。スピンは、2×2 行列 M_2 で与えられ、時間発展は、

$$\tau_S^t(A) = e^{it\sigma_z} A e^{-it\sigma_z}$$

である。全系は、$\mathcal{O} = M_2 \otimes \mathcal{O}_L \otimes \mathcal{O}_R$ によってあらわされる。スピンと heat bath を

$$V = \lambda\left(\sigma_x \otimes \varphi(\alpha_L) \otimes 1 + \sigma_x \otimes 1 \otimes \varphi(\alpha_R)\right) \in \mathcal{O}$$

によって相互作用させる。ここで、$\alpha_L \in \mathfrak{h}_L, \alpha_R \in \mathfrak{h}_R$ を form factor と呼び、$\varphi(f)$ は

$$\varphi(f) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a(f) + a(f)^*\right)$$

により与えられる。$\lambda \neq 0$ が十分小さく、一粒子ハミルトニアン h_L, h_R と、form facctor $\alpha_L \in \mathfrak{h}_L, \alpha_R \in \mathfrak{h}_R$ がいい条件を満たすとき、uniqueness が成り立つことが、C-Liouvillean と呼ばれる non-selfadjoint operator のスペクトル解析により示されている。

2 Heat flow, Entropy Production

状態の非平衡性をあらわす物理量として、熱流（heat flow）と entropy production があげられる。我々は非平衡状態において、これらが non-zero であることを期待する。C^*-環の枠組みにおいて、heat flow は以下のように定義される。

Definition 2.1
$V \in D(\delta_K)$ と仮定する。このとき、K 番目の *reservoir* からの *heat flow* Φ_K を、

$$\Phi_K \equiv \delta_K(V)$$

と定義する。

任意の定常状態 φ において、全ての部分系から流れ出る heat flow の和を考えよう。全系の時間発展 τ が generator $\delta = \sum_K \delta_K + i[V,\cdot]$, により与えられ、$\varphi$ が τ に対して不変であることから、

$$\sum_K \varphi(\Phi_K) = \varphi\left(\sum_K \delta_K(V)\right) = \varphi\left(\delta(V) - i[V,V]\right) = \varphi(\delta(V)) = 0,$$

となる。すなわち、全ての部分系から流れ出る heat flow の和は 0 である。これは、Energy の保存をあらわしている。特に、NESS $\Sigma_\tau(\omega_{\underline{\beta}}^{(0)})$ の全ての元に対して、エネルギー保存則が成り立つ。

次に、entropy production を定義する。entropy production は、relative entropy の変化率として定義される。まず、relative entropy の定義を思い出しておこう。

Definition 2.2 (Relative Entropy [Araki][A1])
ω を C^*-algebra $\mathcal{O}$ 上の状態とし、$(\mathcal{H},\pi,\Omega)$ を ω の GNS 表現とする。Ω は $\pi(\mathcal{O})''$ にたいして cyclic and separating であると仮定する。このとき、$\mathcal{P}$ を Ω に対する natural positive cone とすると、任意の ω-normal state η に対して、$\mathcal{P}$ の元 Ω_η s.t.

$$\eta(\cdot) = \langle \Omega_\eta, \pi(\cdot)\Omega_\eta \rangle$$

が存在する。$\Phi \in \mathcal{P}$ に対し、support of Φ in $\pi(\mathcal{O})''$, $\pi(\mathcal{O})'$ を

$$s(\Phi) \equiv \inf\{P \in \pi(\mathcal{O})'', \text{orthogonal projection } P\Phi = \Phi\}$$
$$s'(\Phi) \equiv \inf\{P' \in \pi(\mathcal{O})', \text{orthogonal projection } P'\Phi = \Phi\}$$

により定義する。

このとき、任意の ω-normal state ξ,η に対して、$\mathcal{H}$ 上の operator

$$S^0_{\eta,\xi}\left(A\Omega_\xi + (1 - s'(\Omega_\xi))\psi\right) = s(\Omega_\xi)A^*\Omega_\eta, \quad A \in \pi(\mathcal{O})'', \quad \psi \in \mathcal{H}$$

は closable である。その closure を $S_{\eta,\omega}$ とかく。さらに Positive Operator $\Delta_{\eta,\xi}$ を

$$\Delta_{\eta,\xi} = S^*_{\eta,\xi}S_{\eta,\xi}$$

と定める。これに対して、Relative entropy $Ent(\eta|\omega)$ は以下のように定義される。

$$Ent(\eta|\xi) \equiv \begin{cases} \langle \Omega_\eta, \ln \Delta_{\xi,\eta}\Omega_\eta \rangle, & s(\Omega_\eta) \le s(\Omega_\xi) \\ -\infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

Relative entropy は、以下の性質をもつ。

Proposition 2.3 *任意の ω-normal state ξ,η に対して、*

$$Ent(\eta|\xi) \le 0.$$

が成り立つ。

次に時間発展が与えられたときに、relative entropy がどのように変化するかを考える。これについては、以下の結果が知られている。

Theorem 2.4 (Ojima, Jakšić and Pillet)
すべての $K=1,\cdots,N$ に対して、 $V\in D(\delta_K)$ とする。このとき、任意の $\omega^{(0)}_{\underline{\beta}}$*-normal state* η に対して、

$$Ent(\eta\circ\tau^T|\omega^{(0)}_{\underline{\beta}}) = Ent(\eta|\omega^{(0)}_{\underline{\beta}}) - \int_0^T \eta\circ\tau^t(\sigma)\,dt,$$

$$\sigma = -\sum_{K=1}^N \beta_K\delta_K(V)$$

が成り立つ。

すなわち、時刻 $t=0$ から $t=T$ relative entropy の時間変化は、$\eta\circ\tau^t(\sigma)$ の時間積分によって与えられる。このことから、entropy production を、以下のように定義する。

Definition 2.5 (Jakšić and Pillet[JP3])
すべての K に対して、$V\in D(\delta_K)$ と仮定する。

$$\sigma = -\sum_{K=1}^N \beta_K\delta_K(V) = -\sum_{K=1}^N \beta_K\Phi_K$$

を *entropy production* と定義する。

Theorem 2.4 と、relative entropy が non-positive であることから、NESS $\Sigma_\tau(\omega^{(0)}_{\underline{\beta}})$ の任意の元 φ_+ に対して、entropy production が non-negative であることがわかる:

$$\begin{aligned}\varphi_+(\sigma) &= \lim_{T_\alpha\to\infty}\frac{1}{T_\alpha}\int_0^{T_\alpha}\omega^{(0)}_{\underline{\beta}}\circ\tau^s(\sigma)\,ds\\ &= -\lim_{T_\alpha\to\infty}\frac{1}{T_\alpha}Ent(\omega^{(0)}_{\underline{\beta}}\circ\tau^{T_\alpha}|\omega^{(0)}_{\underline{\beta}}) \geq 0\end{aligned}$$

このことから、NESS における heat flow について次の自然な事実がえられる：系が二つの部分系からなる場合を考えよう。それぞれの系を L,R によりあらわす。NESS φ_+ について、Energy 保存則から

$$\varphi_+(\Phi_L) = -\varphi_+(\Phi_R)$$

が成り立つ。これを用いて、entropy production の positivity を書き直すと、

$$0 \leq \varphi_+(\sigma) = (\beta_L - \beta_R)\varphi_+(\Phi_R).$$

が得られる。系 L の温度 T_L が 系 R の温度 T_R よりも低いとすると、逆温度 β_L は β_R よりも大きい。したがって、上の式より、

$$0 \leq \varphi_+(\Phi_R)$$

が成り立つ。すなわち、heat flow は、温度の高い系 R から温度の低い系 L へと流れる。

このように、entropy production は non-negative であることは一般的にいうことが出来るが、一方で、それが strictly positive かは、各系について考えなくてはいけない問題である。定義から明らかなように、entropy production が non-zero であることは、heat flow が non-zero であることを意味する。NESS の heat flow, entropy production が non-zero になる例として、以下のようなものが知られている。

1.Spin Fermion model (Jakšić Pillet 2002 [JP1],[JP2])
先にあげた spin fermion model においては、entropy production が strictly positive であることが知られている。

2. One dimensional lattice free-fermion Model
(Dirren 98, Ho Araki 00[HA], Aschbacher Pillet 02[AP])
$\mathcal{O}_R$ を CAR-algebra over $l^2(\mathbb{Z}_+)$、$\mathcal{O}_L$ を CAR-algebra over $l^2(\mathbb{Z}_-)$ とする。全系は、$l^2(\mathbb{Z})$ 上の CAR-algebra とし、その時間発展を

$$\tau_t\left(a\left(f\right)\right) = a\left(\mathrm{e}^{ith}f\right)$$

で与える。ここで、一粒子ハミルトニアン h は、Fourier representation において

$$\widehat{hf}\left(k\right) = \cos k \hat{f}\left(k\right)$$

と与えられる。時刻 0 で、部分系がそれぞれ、時間発展

$$\tau_L^t\left(a\left(f\right)\right) = a\left(\mathrm{e}^{ith_L}f\right),$$
$$\tau_R^t\left(a\left(f\right)\right) = a\left(\mathrm{e}^{ith_R}f\right),$$

について, (β_L, τ_L), (β_R, τ_R) KMS 状態にあるとする。ここで、p_L を $\mathbb{Z}_-$, p_R を $\mathbb{Z}_+$ への射影として、$h_L = p_L h p_L, h_R = p_R h p_R$ である。これに対する NESS は、具体的に計算することが出来て、以下のように与えられる。

$$\Sigma_\tau(\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}) = \{\omega_{\beta_L,\beta_R}\}$$

ここで、ω_{β_L,β_R} は相関関数

$$\omega_{\beta_L,\beta_R}(a(f_n)^* \cdots a(f_1)^* a(g_1) \cdots a(g_m)) = \delta_{nm} \det(\langle f_i, \rho g_j \rangle),$$

で与えられる quasi-free state である。ρ は、フーリエ表示で、掛け算作用素

$$\rho(k) = \begin{cases} \left(1 + e^{\beta_L \cos k}\right)^{-1} & k \in [0, \pi) \\ \left(1 + e^{\beta_R \cos k}\right)^{-1} & k \in [-\pi, 0) \end{cases},$$

となる。

3 Transport Property of NESS

NESS における heat flow, あるいは entropy production は、初期状態における部分系の逆温度 $(\beta_1, \cdots, \beta_N)$ に依存するはずである。これが、どのような依存性を示すかが、次に興味のあるところである。ここでは特に、NESS が一点 $\omega_{\underline{\beta},+}$ からなるとき、Reference inverse temperature β に対して、NESS $\omega_{\underline{\beta},+}$ における J 番目の reservoir からの heat flow

$$\underline{\beta} = (\beta_1, \cdots, \beta_N) \to \omega_{\underline{\beta},+}(\Phi_J)$$

の $(\beta, \cdots, \beta)$ における偏微分を考える：

Definition 3.1
$\omega_{\underline{\beta},+}(\Phi_J)$ が $\underline{\beta} = (\beta, \cdots, \beta)$ において偏微分可能なとき $\omega_{\underline{\beta},+}(\Phi_J)$ の β_K による偏微分を $L_{J,K}$ とかく：

$$L_{J,K} \equiv \partial_{\beta_K} \omega_{\underline{\beta},+}(\Phi_J)\Big|_{\underline{\beta}=(\beta,\cdots,\beta)}.$$

これを *Kinetic coefficient* とよぶ。

異なる $\underline{\beta}$ は一般に $\mathcal{O}$ の異なる表現を与えるため、まず、$\omega_{\underline{\beta},+}(\Phi_J)$ が微分可能であるかどうかも自明でない。したがって、$\omega_{\underline{\beta},+}(\Phi_J)$ が微分可能であるような条件を見つけ、さらにそのとき $L_{J,K}$ はどのように与えられるかを知ることが目標である。本章では、系が time reversal とよばれる対称性をもつとき、Kinetic coefficient $L_{J,K}$ が Green-Kubo formula によって与えられることを示す。

まず、仮定を導入する。以下の仮定は、時間反転対称性をみたす、normal な系を考えるときに、物理的に自然なものである。

Assumption 3.1

(A1) 各 *reservoir* K に対して、ω_K は *unique* な (τ_K, β_K)*-KMS state* である。

(A2) 全ての K に対して、$V \in D(\delta_K)$ である。

(A3) *Anti-linear* $*$*-automorphism* $\Theta : \mathcal{O} \to \mathcal{O}$ *s.t.*

$$\Theta \circ \tau_K^t = \tau_K^{-t} \circ \Theta, \quad \forall K, \quad \Theta(V) = V.$$

が存在する。

(A4) 全ての $\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$*-normal state* η に対して

$$\lim_{t \to +\infty} \eta(\tau^t(A)) = \omega_{\underline{\beta},+}(A), \quad A \in \mathcal{O}.$$

が成り立つような状態 $\omega_{\underline{\beta},+}$ が存在する。

(A5) ω_β : (τ, β)*-KMS state* とすると、任意の $A, B \in \mathcal{O}$ に対して

$$\lim_{|t| \to \infty} \omega_\beta(\tau^t(A)B) = \omega_\beta(A)\omega_\beta(B).$$

(A3) の Θ を time-reversal という。**(A2)** の仮定により、heat flow が定義できる。**(A4)** は、Definition 1.2 で定義された uniqueness である。**(A5)** は mixing property である。

次に、テクニカルな理由による仮定を導入する。以下の notation を用いる。(A1) を仮定する。Generator $\delta_{\underline{\beta}}^{(0)} = \sum_K \frac{\beta_K}{\beta}\delta_K$ により生成される C^*-dynamics を $\sigma_{\underline{\beta}}^{(0)}$ とかく。すると、(A1) から、$\omega_{\underline{\beta}}^{(0)}$ は unique $(\sigma_{\underline{\beta}}^{(0)}, \beta)$-KMS state on $\mathcal{O}$ である。さらに、$\sigma_{\underline{\beta}}$ を $\delta_{\underline{\beta}} = \delta_{\underline{\beta}}^{(0)} + i[V, \cdot]$ で生成される C^*-dynamics とする。これに対し、 unique $(\sigma_{\underline{\beta}}, \beta)$-KMS state $\omega_{\underline{\beta}}$ が存在する。
この $\omega_{\underline{\beta}}$ について、以下の regular とよぶ仮定を行う。この性質は、実際に非自明なモデルにおいて成り立つことが示される [JOP3],[JOPP]。

Definition 3.2
(A1), (A4) が成り立つと仮定する。
全ての $t \geq 0$, $K = 1, \cdots, N$ に対して、

$$\beta_K \mapsto \omega_{(\beta,\cdots,\beta_K,\cdots,\beta)}(\tau^t(A))$$

が $\beta_K = \beta$ において微分可能であるような $A \in \mathcal{O}$ を考える。
このときさらに

$$\beta_K \mapsto \omega_{(\beta,\cdots,\beta_K,\cdots,\beta),+}(A)$$

が $\beta_K = \beta$ で微分可能で、

$$\lim_{t\to+\infty} \partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta}}(\tau^t(A))\big|_{\underline{\beta}=(\beta,\cdots,\beta)} = \partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta},+}(A)\big|_{\underline{\beta}=(\beta,\cdots,\beta)}$$

を満たすとき、A は *regular* であるという。

以上の仮定の下、次の定理が成立する。

Theorem 3.3 (V. Jakšić, Y.O., C.-A. Pillet [JOP1])
(A1)-(A3) が成り立つと仮定する。
$A = A^* \in D(\delta_K)$, $\forall K$, $\quad \Theta(A) = -A$ とする。
すると、全ての $t \in \mathbb{R}$, $\forall K = 1, \cdots, N$ に対して、

$$\beta_K \mapsto \omega_{(\beta,\cdots,\beta_K,\cdots,\beta)}(\tau^t(A))$$

は、$\beta_K = \beta$ で微分可能で、

$$\partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta}}(\tau^t(A))\big|_{\underline{\beta}=(\beta,\cdots,\beta)} = -\frac{1}{2\beta}\int_{-t}^{t}\left(\int_0^\beta \omega_\beta(A\tau^{s+iu}(\Phi_K))du\right) ds$$

さらに、A が *regular* で、 (A4), (A5) が成り立つとすると、

$$\partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta},+}(A)\big|_{\underline{\beta}=(\beta,\cdots,\beta)} = -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \omega_\beta(A\tau^t(\Phi_K))dt.$$

特に、Current Φ_J が regular であるとき、

$$L_{J,K} = \partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta},+}(\Phi_J)\big|_{\underline{\beta}=(\beta,\cdots,\beta)} = -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \omega_\beta(\Phi_J\tau^t(\Phi_K))dt.$$

これを、Green-Kubo formula という。

Remark 3.4 ω_β は (τ,β)-*KMS state* なので、$\forall A, B \in \mathcal{O}$ に対して $\mathcal{D}_\beta = \{z; z \in \mathbb{C}, 0 < \mathrm{Im} z < \beta\}$ 上 *analytic*、$\bar{\mathcal{D}}_\beta$ 上 *bounded* かつ *continuous* な複素関数 $F_{A,B}(z)$ で $F_{A,B}(t) = \omega_\beta(A\tau^t(B))$, $F_{A,B}(t+i\beta) = \omega_\beta(\tau^t(B)A) \quad \forall t \in \mathbb{R}$.
を満たすものが存在する。上記の定理及び以下の記述では、簡単のため $F_{A,B}(z)$ のことを $\omega_\beta(A\tau^z(B))$ とかく。

Proof まず、(A1), (A3) より、$\omega_{\underline{\beta}}$ が time reversal invariant であることに注意する: (A3) より、線型汎関数 $A \in \mathcal{O} \to \omega_{\underline{\beta}} \circ \Theta(A^*)$ は、$(\sigma_{\underline{\beta}}, \beta)$-KMS state であることがわかる。これに対し、(A1) より、$(\sigma_{\underline{\beta}}, \beta)$-KMS state は一意であるので、

$$\omega_{\underline{\beta}} \circ \Theta(A^*) = \omega_{\underline{\beta}}(A), \quad \forall A \in \mathcal{O} \tag{1}$$

が成り立つ。特に、$\Theta(A) = -A$, $A = A^*$ に対して

$$\omega_{\underline{\beta}}(A) = -\omega_{\underline{\beta}}(A) = 0$$

である。

次に、$\underline{\beta} = (\beta, \cdots, \beta_K, \cdots, \beta)$ として、$\sigma_{\underline{\beta}}^{-t} \circ \tau^t(A)$ を t について微分することで、

$$\sigma_{\underline{\beta}}^t(A) - \tau^t(A) = -\frac{\beta - \beta_K}{\beta} \int_0^t \sigma_{\underline{\beta}}^{t-s}(\delta_K(\tau^s(A)))ds$$

を得る。$\omega_{\underline{\beta}} \circ \sigma_{\underline{\beta}}^t = \omega_{\underline{\beta}}$ より、$\omega_{\underline{\beta}}$ に上の式を代入して

$$\omega_{\underline{\beta}}\left(\tau^t(A)\right) - \omega_{\underline{\beta}}(A) = \frac{\beta - \beta_K}{\beta} \int_0^t \omega_{\underline{\beta}}\left(\delta_K(\tau^s(A))\right) ds$$

となる。$\Theta(A) = -A$、$A = A^*$ より、$\omega_{\underline{\beta}}(A) = \omega_\beta(A) = \omega_\beta\left(\tau^t(A)\right) = 0$ なので、

$$\omega_{\underline{\beta}}\left(\tau^t(A)\right) - \omega_\beta\left(\tau^t(A)\right) = \frac{\beta - \beta_K}{\beta} \int_0^t \omega_{\underline{\beta}}\left(\delta_K(\tau^s(A))\right) ds \tag{2}$$

となる。ここで、仮定 **(A1)** より

$$weak* - \lim_{\beta_K \to \beta} \omega_{\underline{\beta}} = \omega_\beta$$

が成り立つので、(2) から、任意の t に対して、$\omega_{\underline{\beta}}(\tau^t(A))$ は、微分可能で、

$$\partial_{\beta_K} \omega_{\underline{\beta}}(\tau^t(A))\big|_{\beta_K = \beta} = -\frac{1}{\beta} \int_0^t \omega_\beta(\delta_K(\tau^s(A)))\, ds$$

がいえる。さらに (1) と **(A3)** から

$$\omega_\beta(\delta_K(\tau^s(A))) = \omega_\beta\left(\Theta\left(\delta_K(\tau^s(A))\right)\right) = \omega_\beta(\delta_K(\tau^{-s}(A)))$$

がなりたち、これを代入することにより、

$$\partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta}}(\tau^t(A))\big|_{\beta_K=\beta} = -\frac{1}{\beta}\int_{-t}^{0}\omega_\beta(\delta_K(\tau^s(A)))\,ds.$$
$$= -\frac{1}{2\beta}\int_{-t}^{t}\omega_\beta(\delta_K(\tau^s(A)))\,ds$$

を得る。

一方、ω_β が τ_K 不変な状態 $\omega_\beta^{(0)}$ の摂動により得られることから、

$$\omega_\beta(\delta_K(A)) = \int_0^\beta \omega_\beta(A\tau^{iu}(\Phi_K))\,du.$$

が成り立つことを示すことが出来る。これを代入して、定理の式

$$\partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta}}(\tau^t(A))\big|_{\beta_K=\beta} = -\frac{1}{2\beta}\int_0^\beta\left(\int_{-t}^{t}\ \omega_\beta(A\tau^{s+iu}(\Phi_K))ds\right)\,du$$

が得られる。

次に、A が regular な場合を考える。関数 $z\to\omega_\beta(A\tau^z(B))$ が analytic であることから、各 $u\in[0,\beta]$ に対して

$$\int_{-t}^{t}\omega_\beta(A\tau^{s+iu}(\Phi_K))\,ds$$
$$= \int_{-t}^{t}\omega_\beta(A\tau^s(\Phi_K))\,ds + \int_0^u\ \left(\omega_\beta(A\tau^{t+iy}(\Phi_K)) - \omega_\beta(A\tau^{-t+iy}(\Phi_K))\right)dy$$

が成り立つ。仮定 (A5) より、第二、第三項は $t\to\infty$ で 0 になるので、

$$\lim_{t\to\infty}\int_{-t}^{t}\ \omega_\beta(A\tau^{s+iu}(\Phi_K))\,ds = \int_{-\infty}^{\infty}\omega_\beta(A\tau^s(\Phi_K))\,ds$$

が得られる。よって、A が regular とすると、

$$\partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta},+}(A)\big|_{\beta_K=\beta} = \lim_{t\to+\infty}\partial_{\beta_K}\omega_{\underline{\beta}}(\tau^t(A))\big|_{\beta_K=\beta} = -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\omega_\beta(A\tau^t(\Phi_K))\,dt$$

が成り立つ。□

Green-Kubo formula から、以下の対称性が導かれる。

Corollary 3.5 (Onsager reciprocity relation)
(A1)-(A5) が成り立ち、*Current* $\{\Phi_K\}_{K=1}^N$ が *regular* であるとき、

$$L_{J,K} = L_{K,J},\quad \forall K,J.$$

Proof Green-Kubo formula より、$L_{J,K}$ は

$$L_{J,K}=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\omega_\beta(\Phi_J\tau^t(\Phi_K))dt=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\omega_\beta(\tau^t(\Phi_J)\Phi_K)dt$$

と与えられる。これに対し、KMS-condition より、

$$\begin{aligned}L_{J,K}&=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\omega_\beta(\Phi_K\tau^{t+i\beta}(\Phi_J))dt\\&=-\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2}\int_{-T}^{T}\omega_\beta(\Phi_K\tau^t(\Phi_J))dt\\&\qquad+\int_0^\beta\left(\omega_\beta(\Phi_K\tau^{T+iu}(\Phi_J))-\omega_\beta(\Phi_K\tau^{-T+iu}(\Phi_J))\right)du\end{aligned}\tag{3}$$

が成り立つ。仮定 (A5) より、第二、三項は $T\to\infty$ で 0 となるので、

$$(3)=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\omega_\beta(\Phi_K\tau^t(\Phi_J))dt=L_{K,J}$$

となり、求める対称性が得られた。□

References

[A1] H. Araki: *Relative Hamiltonian for faithful normal states of a von Neumann algebra*, Publ. R.I.M.S., Kyoto Univ. **9** 165-209 (1973).

[AP] W.H. Aschbacher C.A. Pillet , *Non-Equilibrium Steady States of the XY Chain* mp-arc /02-459 ,(2002).

[HA] T.G.Ho,andH.Araki, *Asymptotic time evolution of a partitioned infinite two-sided isotropic XY-chain* Proc.SteklovInst.Math,**228** 191-204 (2000).

[JOP1] Jakšić, V., Ogata, Y., Pillet, C.-A.: The Green-Kubo formula and the Onsager reciprocity relations in quantum statistical mechanics, mp-arc 05-215

[JOP2] Jakšić, V., Ogata, Y., Pillet, C.-A.: The linear response theory in quantum statistical mechanics. mp-arc 05-334

[JOP3] Jakšić, V., Ogata, Y., Pillet, C.-A.: The Green-Kubo formula for the spin-fermion system mp-arc 05-335

[JOPP] Jakšić, V., Ogata, Y., Pautrat, Y., Pillet, C.-A.: In preparation.

[JP1] V.Jakšić and C.A.Pillet, *Non-equilibrium steady states of finite quantum systems coupled to thermal reservoirs.* Commun. Math. Phys. **226** no.1, 131-162,(2002)

[JP2] V.Jakšić and C.A.Pillet, *Mathematical theory of non-equilibrium quantum statistical mechanics.* J. Statist. Phys. 108 (2002), no. 5-6, 787–829

[JP3] Jakšić, V., Pillet, C-A.: On entropy production in quantum statistical mechanics. Commun. Math. Phys. **217**, 285 (2001).

[R] D.Ruelle,*Natural nonequilibrium states in quantum statistical mechanics.* J.Stat.Phys. **98**,57–75,(2000)